

УДК 004.896

Применение методов искусственного интеллекта для автоматизации спектрального анализа плазмы

Булавкина Анна Михайловна^(*)

bam22ea106@student.bmstu.ru

Егошин Денис Андреевич

egoshinda@bmstu.ru

Павлов Алексей Вячеславович

alekseipavlov@bmstu.ru

Скрябин Андрей Станиславович

skriabin@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

Аннотация. Разработан макет программного обеспечения спектрального анализа плазмы, в основе которого лежат методы искусственного интеллекта. Для обучения модели сгенерирован датасет из 100 000 модельных спектров с использованием базы данных NIST. Диапазон моделирования включал спектры чистых элементов и их комбинаций, с числом компонентов от одного до семи (H, O, N, Cu, Fe, Ti, Ni, Cr), в диапазоне длин волн 180–1140 нм. На валидационной выборке синтетических спектров модель показала высокие значения точности, полноты и F-меры (0,86; 0,88 и 0,86 соответственно) и подтвердила работоспособность при тестировании на экспериментальных данных. Точность распознавания спектров моделью составила более 85 %, что подтверждает возможность интеграции ИИ для автоматизации спектрального анализа, например в системы ЛИЭС.

Ключевые слова: лазерно-искровая эмиссионная спектрометрия (ЛИЭС), спектральный анализ плазмы, искусственный интеллект, машинное обучение, обработка спектральных данных

AI-based automation of plasma spectral analysis

Bulavkina Anna Mikhailovna

bam22ea106@student.bmstu.ru

Egoshin Denis Andreevich

egoshinda@bmstu.ru

Pavlov Alexey Vyacheslavovich

alekseipavlov@bmstu.ru

Scriabin Andrey Stanislavovich

skriabin@bmstu.ru

BMSTU, Moscow, Russia

Abstract. A mock-up of plasma spectral analysis software based on artificial intelligence methods has been developed. To train the model, a dataset of 100,000 model spectra was generated using the NIST database. The modeling range included spectra of pure elements and their combinations, with the number of components from one to seven (H, O, N, Cu, Fe, Ti, Ni, Cr), in the wavelength range 180–1140 nm. On the validation sample of synthetic spectra, the model showed high values of precision, recall, and F-score (0.86, 0.88, and 0.86 respectively) and confirmed its operability when tested on experimental data. The accuracy of spectrum recognition by the model was more than 85 %, which confirms the possibility of integrating AI to automate spectral analysis, for example, into LIBS systems.

Keywords: laser-induced breakdown spectroscopy (LIBS), plasma spectroscopy, artificial intelligence, machine learning, spectral data processing

Введение. Спектральный анализ является одним из ключевых инструментов экспериментальной диагностики плазмы. Он применяется как в фундаментальных исследованиях, так и в промышленных технологиях, позволяя определять количественные параметры плазмы: электронную температуру, плотность заряженных частиц, степень ионизации и идентифицировать химический состав. Примером технологии, в основе которой находятся возможности спектрального анализа, является лазерно-искровая эмиссионная спектрометрия (ЛИЭС) — метод, основанный на исследовании спектра, формируемого переходами между энергетическими уровнями атомов или ионов в плазме [1]. Ключевыми элементами системы ЛИЭС можно выделить лазер, оптическую систему для фокусировки лазерного импульса на образце и спектрометр с детектором для регистрации спектра. Лазерный луч, проходя через оптическую систему, аблирует поверхность образца, создавая облако пара, нагревает и ионизует пар, индуцируя высокотемпературную плазму. По мере ее остывания частицы релаксируют, что сопровождается испусканием квантов света с длиной волны уникальной для каждого элемента. Это излучение собирается оптической системой и передается в спектрометр, который раскладывает излучение в спектр. Полученный спектр представляет собой нормализованный вектор интенсивности спектра, содержащий связанные значения длин волн и их интенсивностей, соответствующих энергетическим переходам электронов в атомах и ионах различных элементов.

Развитие уровня технологии изготовления сплавов, пластиков и т. п., приводит к постоянному росту сложности объектов исследования, выражающейся в увеличении числа перекрывающихся спектральных линий и необходимости обработки больших массивов данных. Это приводит к низкой эффективности традиционных методов анализа, основанных на ручной интерпретации или полуавтоматических алгоритмах, что актуализирует необходимость разработки новых подходов к обработке и интерпретации спектральных данных, например с помощью внедрения методов искусственного интеллекта (ИИ).

В данной работе предложен макет программного обеспечения (ПО) для ЛИЭС с использованием ИИ. Такой подход способен дополнить и оптимизировать отдельные узлы существующих программ, основанных на традиционных методах обработки (LIBSsa [2], ClarityNeXt [3], LIBSoft [4] и др.).

Материалы и методы. Для обучения ИИ использовались модельные спектры, сгенерированные из различных комбинаций (до 7 различных элементов в одном спектре) неионизованного, одно- и двукратно ионизованных состояний следующих элементов: H, O, N, Cu, Fe, Ti, Ni, Cr. Для создания спектров из базы данных NIST импортировали данные о статических весах и энергиях электронов на соседних уровнях и вероятностях перехода между уровнями, соответствовавшие конкретной длине волны в диапазоне от 180 до 1140 нм.

При построении модельных спектров интенсивности рассчитывались на базе статических весов и температуры, которую оценочно принимали рав-

ной от 5 до 50 кК. Ширина линий определялась в соответствии с профилем Фойгта [5] конкретных значений длин волн. Для приближения синтетических спектров к реальным данным был введен учет фонового излучения, а также учитывалась вероятность присутствия данного состояния атома вещества в соответствии с уравнением Саха [6]. Таким образом, для обучения было сгенерировано 100 000 спектров, причем каждый элемент (или одно из его ионных состояний) присутствовал в приблизительно 14 % спектров.

Полученный датасет использовался для обучения ИИ, обеспечивающего многоклассовую классификацию состава плазмы по спектру излучения. Модель представляет собой полносвязную архитектуру на основе TensorFlow [7], принимающую на вход нормализованный вектор интенсивности спектра из длин волн и интенсивностей и предсказывающую вероятность содержания одного из элементов, использованных для создания датасета. Выходной слой модели использует сигмоидную активацию, что позволяет учесть совместное присутствие нескольких пересекающихся линий элементов в одном спектре. Обучение проводилось с применением механизма dropout, что позволило достичь стабильной сходимости и избежать переобучения. На валидационной выборке модель показала высокие значения точности, полноты и F-меры (0,84; 0,88 и 0,86 соответственно), что говорит о возможности ее интеграции в существующие системы после незначительной доработки и оптимизации.

Помимо валидации модели на выборке синтетических спектров было выполнено тестирование модели на экспериментально полученных спектрах с установки, представленной на рисунке. В ходе эксперимента аблировался образец из титана в атмосфере воздуха. Модель успешно распознала характерные линии на спектре.

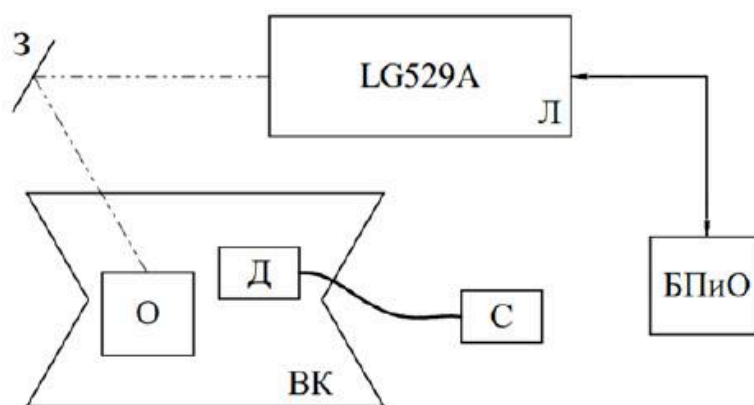


Схема экспериментальной установки:

З — зеркало; Л — лазер; О — образец; Д — детектор; С — спектрометр;
БПиО — блок питания и охлаждения; ВК — вакуумная камера

Результаты. Таким образом, был разработан макет ПО, состоящий из модели для распознавания спектров. Также была разработана программа для генерации модельных спектров излучения различных элементов (H, O, N, Cu, Fe, Ti, Ni, Cr) для неионизованного, одно- и двукратно ионизованных состоя-

ний, созданные с использованием БД NIST, в диапазоне от 180 до 1140 нм. Разработанная модель ИИ была верифицирована как на выборке синтетических спектров, так и на экспериментально полученных в рамках эксперимента. Точность распознавания спектров моделью составила более 85 %, что говорит о возможности ее внедрения в существующие установки после незначительной доработки.

«Пучок-М» МГТУ им. Н.Э. Баумана, при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по государственному заданию FSN-2024-0007.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- [1] Fantoni R., Caneve L., Colao F., Fornarini L. Laser induced breakdown spectroscopy (LIBS). *Advances in Spectroscopy for Lasers and Sensing*, 2006, pp. 229–254. https://doi.org/10.1007/1-4020-4789-4_13
- [2] Stenio K., Milori D. LIBSsa: an open-source software for analyzing LIBS spectra. *The Journal of Open Source Software*, 2024, vol. 9 (93), 5961 p. <https://doi.org/10.21105/joss.05961>
- [3] *ClarityNeXt. Data Analysis Software. Applied Spectra*. URL: <https://appliedspectra.com/products/claritynext.html> (accessed 21.08.2025).
- [4] *LIBSoft 2020. Software. Products. Applied Photonics Ltd. Laser-Induced Breakdown Spectroscopy (LIBS)*. URL: <https://appliedphotonics.co.uk/products/software/applied-photonics-libsoft> (accessed 21.08.2025).
- [5] Rao A., Gragston M., Patnaik A., Hsu P. Measurement of electron density and temperature from laser induced nitrogen plasma at elevated pressure (1–6 bar). *Opt. Express*, 2019, vol. 27, pp. 33779–33788. <https://doi.org/10.1364/OE.27.033779>
- [6] Жданов С.К., Курнаев В.А., Романовский М.К., Цветков И.В. *Основы физических процессов в плазме и плазменных установках*. Москва, МИФИ, 2007, 368 с.
- [7] *TensorFlow. Documentation*. URL: https://www.tensorflow.org/api_docs (дата обращения 21.08.2025).